

## OPPONENSI VÉLEMÉNY

### Csizmadia G. Imre „A szerves kémia digitalizációja” című doktori értekezéséről

Csizmadia professzor úr nagyon nehéz feladatra vállalkozott azzal, hogy több, mint fél évszázados tudományos munkáját próbálta összefoglalni egy „tézises dolgozat” keretében. Bizarr a bíráló feladata is, hiszen részben a 60-70-esek években elért eredményeket kell megítélni úgy, hogy időközben óriási fejlődésen ment át a számításhoz kémia, az akkori világra szóló eredmények ma már tájékozódó jellegű eredményként sem használhatóak.

Mindehhez a jelölt egy szokatlan formát választott. A teljes dolgozat hivatkozásokkal együtt 37 oldal és négy fejezetből áll, amelyet egy „Életút és Motivációk” és egy „Deklaráció” c. fejezetek egészítenek ki. Az első, bár érdekes olvasmány, nagyon idegen egy doktori értekezéstől, a három mondatból álló második pedig teljesen felesleges, az itt „deklarált” tények később többször is megállapításra kerültek. Az első valós fejezet (Bevezetés) sok tekintetben megismétli az „Életút és Motivációk” mondanivalóját, illetve olyan információkat tartalmaz (publikációs görbe, tanítványok felsorolása), melyek nagyon impresszívek, de nem a tudományos teljesítmény, hanem a habitus megítélésében segítenek. Előkerül továbbá egy jövőkép felvázolása, amit majd a 4. fejezet kapcsán fogok részletesebben elemezni. A nyúl farknyi „Alkalmazott módszerek” fejezet is nehezen ítélni meg, felsorolja a számításhoz kémia szinte teljes eszköztárát, de arra nézve, hogy e módszerek milyen pontos eredményekre vezethetnek, semmi sem utal. Hiányolom a rövidítések feloldását is.

Az eredményeket és téziseket a 3. fejezet sorolja fel. Tézisek megfogalmazása is szokatlan, akkoriban új kutatási terület bevezetéséről számol be, az elért eredmények legtöbbször csak érintőlegesen szerepelnek. Az *első tézispont* professzor úr által végzett első kvantumkémiai számításokról tudósít, ezek akkori jelentőségét nehéz túlbecsülni, hiszen a kvantumkémia egészére nézve **nagyon** jelentős eredmények voltak. Hasonlóan nagy jelentőséggel bírtak a *második tézispontban* felsorolt munkák, melyek már nem csak az energia és pályák meghatározásra voltak alkalmasak, hanem a molekulák szerkezetét is le tudták írni. E tézispont utolsó bekezdésében megfogalmazottak azonban nem tekinthetők tudományos eredménynek, hiszen aligha lehetett általános vélekedés korábban, hogy a molekulák tulajdonságai véletlenszerűek; ne felejtjük, hogy Dirac 30-as évekből származó, gyakran idézett mondata is kiemelte a kémiai tulajdonságok kvantummechanikai eredetét. A *harmadik tézispont* a potenciálfelületek fontosságát emeli ki, azonban az utolsó mondat kicsit eltúlozza professzor úr szerepét: például a potenciálfelületek gradiensét számító módszerek ekkor már 10 éve ismertek voltak. A *negyedik tézispont* reakciómechanizmusokkal kapcsolatos, akkoriban nagyon jelentős eredményekről számol be. Az *ötödik tézispont* már a biológia szempontjából fontos, peptidok konformációs tulajdonságaira vonatkozó, ismét csak jelentős eredményeket sorolja fel. A *hatodik tézispont* fizikai-kémiai koncepciók kvantumkémiai számításból való levezetéséről szól. Ismereteim szerint ezeknek a munkáknak már jelentős konkurenciája akadt az irodalomban, de jelentőségük alapján vitán felül hozzájárulnak az itt megítélendő tudományos teljesítményhez. A *hetedik tézispont* az egyetlen, amely mindössze egy dolgozatra épít: az erre kapott tíz független hivatkozás nem támasztja alá a munka tézispontban állított jelentőségét, véleményem szerint ebben nagyban elmarad a korábbi tézispontok tartalmától. Végül a *nyolcadik tézispont* teljes mértékben értelmezhetetlen a jelen formában. Egy doktori dolgozatban ugyan van helye „jövőképek”, de a „tézises” forma a szükséges tudományos érvelésnek nem ad helyet, és itt publikációval sincs alátámasztva. Talán

ezért született a 4. fejezet, melyet alább elemzek. Azonban a “Mindent elő lehet állítani katalitikus elektronkémia reakcióval” kijelentés tudományosan nincs alátámasztva, túl általános, tézisként értelmezhetetlen, ezt tehát nem fogadom el.

A 4. fejezet tehát a 8. tézispont alátámasztása céljából került a dolgozatba. Azonban az itt felsorolt érvek nagyon általánosak, tudományos munkaként ebben a formában, tartalmi helyességük ellenére sem állnak meg helyüket. Példaként említem a 15. ábra jobb oldali paneljét, amelyen „katalizátorkémia” sematikus ábrája minden konkrétumot nélkülöz. Hasonló problémát látok a „sötétzöld” kémia vagy „katalitikus elektrokémia” sémáiban is. Az itt felsorolt elvek már hosszú ideje szerepelnek a kémiai gondolkodásban, új eredményeknek semmiképpen nem tekinthetőek. Képezhetik természetesen jövőbeli munkák alapját, azonban jelen formájukban nem alkalmasak arra, hogy a doktori fokozat odaítélésénél figyelembe vegyünk ezeket.

A hivatkozási lista a munkát alátámasztó 46 cikket sorolja fel, melyek 1963 és 2013 között kerültek publikálásra. Azt gondolom, még ebben a formában is szükséges lett volna néhány konkurens, vagy az itt felsorolt eredményekre építő munka hivatkozása is.

A fentiek alapján az első hét tézispontot (történelmileg) jelentős tudományos eredménynek ítélem meg és elfogadom, azonban a nyolcadikat nem.

Összefoglalva: Csizmadia Imre munkásságával már évtizedekkel ezelőtt kiérdemelte volna az MTA doktor fokozatot. Jelen tézisszerű dolgozat megmutatja jelentős hozzájárulását az elméleti szerves kémia fejlődéséhez. Mindazonáltal, a dolgozat mind formátumában, mind tartalmában erősen eltér a szokásostól. Ez a kettősség rendkívül nehéz helyzetbe hozza a bírálót. Kiutat ebből a dilemmából az jelenthet, hogy a formai érveket kevésbé veszi figyelembe, tekintettel arra, hogy a habitusvizsgálat során ezt a Doktori Bizottság már amúgy is megtette. Maradva annál az érvelésnél, hogy Csizmadia Imre többévtizedes, nemzetközileg jelentős munkássága megfelel az MTA Doktora címhez támasztott követelményeknek, a dolgozat vitára bocsátását javaslom, sikeres védelem esetén a cím megítélést támogatom.

Budapest, 2022. március 20.



Dr. Szalay Péter  
az MTA doktora  
egyetemi tanár